

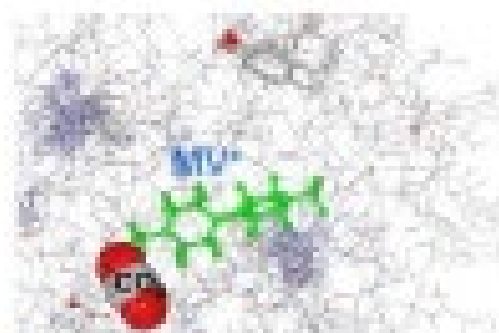
## 🍀 6年間の人工光合成研究拠点事業を振り返って（その②）

前号に引き続き6年間の人工光合成研究拠点事業の振り返り企画として、学外研究者との特徴的な共同研究成果について紹介します。

本号では理論化学と生体触媒化学とを融合し、新たな人工光合成系に貢献するであろう共同研究の成果について紹介します。人工光合成研究センターではギ酸脱水素酵素を二酸化炭素還元触媒として色素や半導体光触媒と複合化した光エネルギーによる二酸化炭素のギ酸への選択的還元に関する研究を進めてきました。この反応系では色素とギ酸脱水素酵素とを連結するために電子メディエータが必要です。しかしながら、意外にも電子メディエータとギ酸脱水素酵素との直接的な相互作用を検討した研究例はありませんでした。特に生体触媒、電子メディエータ及び二酸化炭素との相互作用を理論化学的アプローチから解明する試みもありませんでした。

人工光合成研究拠点では、東京工業大学宮地輝光助教との公募型共同研究として、代表的な電子メディエータであるメチルビオローゲンとギ酸脱水素酵素との相互作用についてドッキングシミュレーションや密度汎関数理論計算により明らかにしました。酵素反応速度論に基づいたいくつかの反応モデル解析を大阪市大で、理論化学的計算に基づくギ酸脱水素酵素内でのメチルビオローゲン陽イオンラジカルの結合様式及び密度汎関数理論によるメチルビオローゲン陽イオンラジカルの電子状態解析を宮地助教がそれぞれ担当する形で共同研究を実施し、ギ酸脱水素酵素内でのメチルビオローゲン陽イオンラジカルと二酸化炭素の結合様式を明らかにし、ギ酸脱水素酵素を触媒として二酸化炭素をギ酸へ還元する過程において、メチルビオローゲン陽イオンラジカルによる電子供給の機構を突き止めました。

この成果は、二酸化炭素を効率的に有機分子に変換する人工光合成系実現に向け、触媒機能を向上させる補酵素の開発・設計における重要な指針になるものと考えられます。



ギ酸脱水素酵素内でのメチルビオローゲン陽イオンラジカルと二酸化炭素の結合様式の予測図

なおこの研究成果は Royal Society of Chemistry 発行の *Physical Chemistry Chemical Physics* 誌に掲載されました。

発表雑誌： *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2020, 22, 18595 - 18605

論文名： How does methylviologen cation radical supply two electrons to the formate dehydrogenase in the catalytic reduction process of CO<sub>2</sub> to formate?

前号本号で紹介しましたように、人工光合成研究拠点では、特定の分野に偏らず多様な人工光合成研究に関する共同研究を進めてきました。

(今月の担当は天尾豊 教授でした)

人工光合成研究拠点

ニュースレター

第6巻・第11号

2022年2月14日発行

発行責任者：天尾豊

(人工光合成研究センター所長)

編集責任者：吉田朋子 (同副所長)

拠点 HP は [こちら](#)

